動的不均一場中の粒子についての分子動力学シミュレーション

九州大学 工学研究院　鳴海 孝之[1]，日高 芳樹，鈴木 将，甲斐 昌一

階層モデルにより生成された動的不均一場の中を運動する粒子のダイナミクスを分子動力学法により研究し，粒子変位の非ガウス性が動的不均一場のゆらぎと対応していることを明らかにした．

1　緒言

対象とする系が微細になるにつれ，環境の時空スケールと対象の時空スケールとを明確に切り分けることが難しくなる．そのような系では環境から対象への影響を単純な熱的雑音とみなすことの保証はなく，時空間相関を持った非熱的雑音が対象へ及ぼす影響を考慮する必要がある．本研究では階層的ランジュバン型拡散方程式により動的不均一場を生成し，その中を運動する粒子のダイナミクスを分子動力学法により研究した．モデルにより生成された動的不均一場はそれ自体の性質を制御することができ，動的不均一場の対象への影響を系統的に調べることを可能にする．

階層的ランジュバン型拡散方程式は，秩序変数場 $u = u(\boldsymbol{r}, t)$ と非熱的雑音 $z = z(\boldsymbol{r}, t)$ について

$$\partial_t u = \quad \mathrm{d}_u V(u) + \xi_u^2 \nabla^2 u + z\ , \quad \partial_t z = \quad \gamma z + \xi_z^2 \nabla^2 z + \eta \tag{1}$$

と表される．ここで，$V(u) = au^2 \quad u^3 + u^4$ は秩序変数の状態を定めるポテンシャル，$\eta = \eta(\boldsymbol{r}, t)$ は分散 σ_η^2 の時空間白色ガウス雑音を表し，γ および ξ_z/ξ_u で時空間スケールを特徴付ける．

粒子の拡散係数の値が秩序変数場 u に従って時間空間的に変化するとき，粒子の運動は

$$\mathrm{d}_t \boldsymbol{V}(t) = \quad \gamma_p(u)\boldsymbol{V}(t) + \sqrt{2D_p(u)}\boldsymbol{R}(t) \tag{2}$$

に従う．なお，$\boldsymbol{R}(t)$ は分散が 1 の白色ガウス雑音である．ここでは，ポテンシャルの極大値 u_m を境界として状態を (l) と (r) の二つに分けることにより γ_p と D_p を

$$(\gamma_p(u), D_p(u)) = \begin{cases} (\gamma_p^{(l)}, D_p^{(l)}) & \text{for } u \le u_m \\ (\gamma_p^{(r)}, D_p^{(r)}) & \text{for } u > u_m \end{cases} \tag{3}$$

と設定する．いま，等温系を考えるため拡散係数 D_p と粘性係数 γ_p との間には $D_p = \gamma_p k_B T$ の関係が常に成立しているものとする．このモデルでは他粒子からの直接相互作用は考慮されておらず，それらは動的不均一場を通じて着目する粒子のダイナミクスに影響を及ぼしていると考える．

以下では二次元系を考え，粒子変位の非ガウス性を示すノンガウシアンパラメータ [1] $\alpha_2(t) = M_4(t)/2M_2(t)^2 \quad 1$ について議論する．なお，$M_n(t)$ は平均 n 乗変位を表す．なお，a を制御パラメータ，$\gamma = 1$，$\xi_z/\xi_u = 5.0$ とし，σ_η は $\langle z^2 \rangle = 0.1$ を満たすように変化させて動的不均一場を生成する．また，粒子ダイナミクスのパラメータは $k_B T = 1.0$，$D_p^{(r)}/D_p^{(l)} = 10^{\ 2}$ とする．

[1]E-mail: narumi@athena.ap.kyushu-u.ac.jp

2 結果と議論

図1は秩序変数 u が状態 (l) である面積分率 $S^{(l)}$ とその分散 σ_S^2 の a 依存性を示す．a の増大に伴って $S^{(l)}$ は単調に増大するが，σ_S^2 は $a=0.25$ のときに最大値をとる．a により制御された動的不均一場中を運動する粒子の $\alpha_2(t)$ を測定したところ，短時間領域と長時間領域で0に漸近しており，t_{NGP} で正のピークが観測された．$S^{(l)}$ が増加するにつれて t_{NGP} は小さくなるのだが，$D_p^{(r)}/D_p^{(l)}<1$ であることを考慮すると，拡散しやすい領域が増すことで二つの状態が競合する特徴的な時間が短くなることと対応している．一方，$\alpha_2(t)$ のピークの高さを $\alpha_{2,\mathrm{max}}$ とするとき，図2と図3から明らかなように，非ガウス性は動的不均一領域の面積分率にではなく，面積分率の分散に対応して大きくなっていることが分かる．特に図3は $\alpha_{2,\mathrm{max}}$ が σ_S^2 に対して線形で変化していることを示している．非ガウス性が動的不均一性と関連しているということは今までにも知られていたが，具体的に動的不均一性のどの性質と対応しているかは明らかではなかった．しかし，これらの結果から動的不均一場のゆらぎが非ガウス性の起源となることが明らかになった．

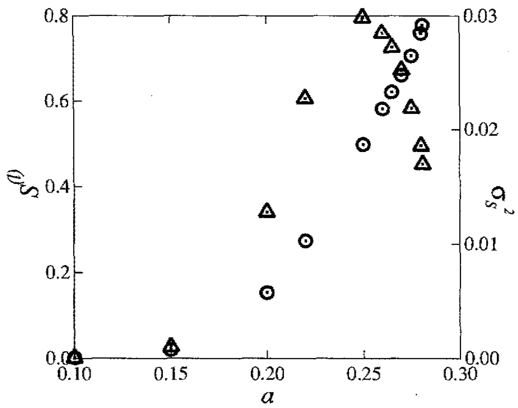

図 1: $S^{(l)}$(丸，左軸) および σ_S^2（三角，右軸）の a 依存性

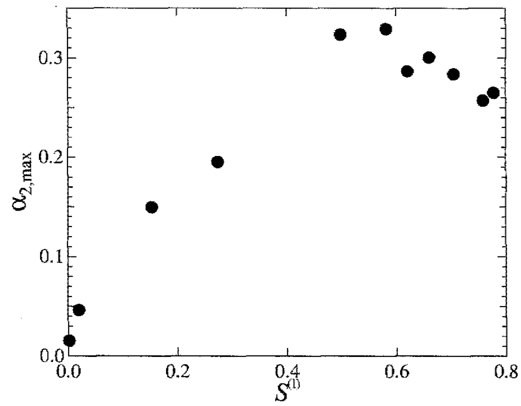

図 2: 非ガウス性 $\alpha_{2,\mathrm{max}}$ の $S^{(l)}$ 依存性

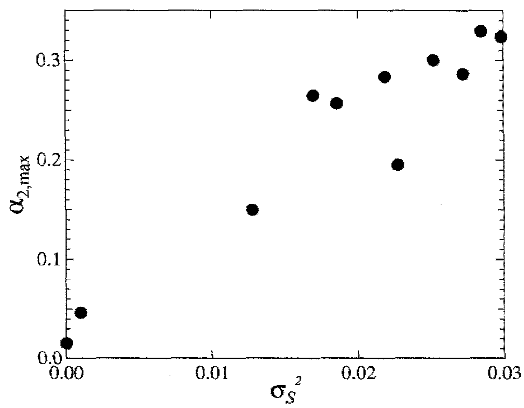

図 3: 非ガウス性 $\alpha_{2,\mathrm{max}}$ の σ_S^2 依存性

3 結言

階層的ランジュバン型拡散方程式により動的不均一場を生成し，その中を運動する粒子の一粒子ダイナミクスを分子動力学法により調べたところ，粒子変位の非ガウス性の大きさが動的不均一場のゆらぎと対応していることが明らかになった．今後は動的不均一場のゆらぎが一粒子ダイナミクスに及ぼす影響を解析的に明らかにすることを目指す．また，ここで明らかになった性質がこのモデルにとどまらず一般的に成立するのか検討する必要がある．

参考文献

[1] A. Rahman, Phys. Rev. **136** (1964), A405.